



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2021/2022



Facultad de Ciencias

PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO/EMPRESA

DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	Preparación de Compuestos de Coordinación Basados en Iones Lantánidos con Propiedades de Molécula Imán		
CÓDIGO TFG ⁽¹⁾	QI-21/22-06	TIPOLOGÍA ⁽²⁾	A2

⁽¹⁾ A rellenar por la dirección del dpto que vendrá dado como: código del dpto-Nº de orden

⁽²⁾ Al final del documento se encuentran las diferentes tipologías

OFERTADO POR	Profesor del Departamento	<input checked="" type="checkbox"/>
	Profesor del Departamento junto con Empresa o Institución	<input type="checkbox"/>

DATOS DE LA ENTIDAD (donde se va a realizar el TFG)

CENTRO (Departamento, institución o empresa)	Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias		
DIRECCIÓN POSTAL ⁽³⁾	Av. Fuentenueva S/N		
LOCALIDAD ⁽³⁾	Granada	C.P. ⁽³⁾	18071

⁽³⁾ A rellenar en el caso de realizarse en una empresa

DATOS DEL TUTOR

TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
NOMBRE Y APELLIDOS	Enrique Colacio Rodríguez		
DEPARTAMENTO	Química Inorgánica		
CARGO ⁽⁴⁾	Catedrático de Universidad		
TELÉFONO	958243236	E-MAIL	ecolacio@ugr.es

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

TUTOR 2			
NOMBRE Y APELLIDOS	María del Mar Quesada Moreno		
DEPARTAMENTO	Química Inorgánica		
CARGO ⁽⁴⁾	Contratada postdoctoral (Junta de Andalucía)		
TELÉFONO	958240442	E-MAIL	mqmoreno@ugr.es
TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
NOMBRE Y APELLIDOS			
TITULACIÓN			
TELÉFONO		E-MAIL	

⁽⁴⁾ Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

Introducción.

Debido a problemas medioambientales y económicos, existe una mayor demanda en nuestra sociedad de una mayor capacidad de almacenamiento de datos y de dispositivos electrónicos más rápidos, duraderos y de menor consumo. Los imanes unimoleculares (*Single Molecule Magnets*, SMMs) son compuestos de coordinación de metales moleculares que pueden, por debajo de cierta temperatura, mostrar un efecto de memoria magnética y comportarse como pequeños imanes para almacenar información (1 bit de datos/molécula). Los discos duros basados en SMMs podrían soportar hasta 30 Tbit/cm² (cien veces más que los mejores discos duros magnéticos comerciales). Hasta la fecha, la gran mayoría de los SMMs funcionan a temperaturas ligeramente superiores al helio líquido. El reciente descubrimiento de SMMs de Dy(III) basados en metalocenos capaces de operar a temperaturas cercanas (60 K) o incluso superiores (80 K) a la del nitrógeno líquido abre el camino hacia el desarrollo de dispositivos nanomagnéticos moleculares que funcionen a temperaturas prácticas. Sin embargo, estos SMMs de Dy(III) basados en metalocenos son extremadamente inestables al aire y a la humedad, lo que impide que sean comercialmente prácticos para servidores de datos. Hasta la fecha, no existe un SMM que combine un efecto de memoria magnética a altas temperaturas y estabilidad al agua y al aire. Este logro sería equivalente al desarrollo de los primeros superconductores de alta temperatura que funcionaban a temperaturas de nitrógeno líquido reportados en la década de 1980.

Objetivos.

El principal objetivo de este Trabajo Fin de Grado es la síntesis y caracterización de compuestos mononucleares de Dy(III) con geometría de coordinación bipirámide pentagonal que presenten propiedades de molécula imán a altas temperaturas y conseguir así un efecto de "memoria magnética" a temperaturas más realistas para su aplicación. Un aspecto importante a destacar de los compuestos que se van a preparar es su estabilidad frente a la oxidación por el aire y a la humedad, propiedades que no presentan los SIMs con temperaturas más altas basados en metalocenos y que son básicas para su aplicación en dispositivos.

Resumen de los trabajos a realizar por el estudiante/Plan de trabajo.

- Síntesis y caracterización de ligandos orgánicos empleado principalmente resonancia magnética nuclear de protón y carbono y espectrometría de masas.
- Síntesis, cristalización y caracterización de los complejos de Dy(III) con geometría de coordinación bipirámide pentagonal a partir de los ligandos sintetizados.
 - Para la obtención de los complejos se utilizarán diferentes métodos de síntesis probando diferentes disolventes y sales metálicas del ion lantánido y técnicas de cristalización (evaporación lenta, difusión en gel, etc.).
 - Sus estructuras se determinarán mediante difracción de rayos X monocristal (SC-XRD), mientras que la pureza de las muestras se comprobará mediante análisis elemental y difracción de rayos X en polvo (XRPD).
 - Estos complejos se caracterizarán mediante las espectroscopías IR, Raman y UV-vis en disolución y en estado sólido.
- Finalmente, el estudiante se involucrará en la medida y análisis de las propiedades magnéticas de los complejos sintetizados (susceptibilidad de corriente directa (dc) y alterna (ac)).

Una vez cumplimentado deberá ser enviado junto con el resto de las propuestas del departamento en formato pdf al correo: gradoquimica@ugr.es. El nombre de cada fichero debe de coincidir con el código del TFG.

TIPOLOGÍA⁽²⁾

A. Trabajos de investigación con orientación básica o aplicada, cuya temática se relacione con los contenidos de la titulación, como:

- A1. Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado, a partir de material ya disponible en los Centros.
- A2. Trabajos experimentales, de toma de datos de campo, de laboratorio, etc.
- A3. Elaboración de guías prácticas relacionadas con la temática del Grado.

B. Trabajos científico-técnicos representativos del ejercicio profesional para el que capacita la titulación, como:

- B1. Elaboración de un informe o un proyecto de naturaleza profesional.
- B2. Elaboración de un plan de empresa.
- B3. Simulación de encargos profesionales.

C. Trabajos bibliográficos (C)